Energy Transport and Kinetics of ERCAs

基研　武末真二

微視的な世界は力学に支配され、巨視的な世界では熱力学が成立する。その間をつなぐ方法論として存在するのが統計力学である。しかし、Gibbs の formalism は、動力学の問題をエルゴード仮説の名のもとに、すべて絨毯の下に隠してしまった。微視的可逆性と巨視的不可逆性との間の不調和は、Boltzmann 以来、未だ解決されざる難問として我々の前に横たわっている。

今世紀後半のコンピュータの発達は、この問題に対する新しいアプローチを可能にした。その端緒となったのは、よく知られているように、Fermi-Pasta-Ulam の数値実験である。それ以来、多くの仕事がなされたが、その殆どはハミルトン力学系に基づくものであった。しかし、ハミルトン系にはＫＡＭなどの微妙な問題が存在するし（それはそれでおもしろい問題であるが本質的には力学から一歩も出ない話である）、大自由度を扱うのは現在の計算機ではまだまだ困難がある。もちろん、ＫＡＭだろうが何だろうが、大自由度での振舞が大切であることはいうまでもない。

ところで、統計力学に至るには、必ずしもハミルトン系を出発点としなければいけないわけではない。ハミルトン系の性質の中で、統計力学の formulation に用いられるのは、相空間体積の保存 (Liouville の定理) とエネルギー保存則の２点だけである。微視的リアリティを犠牲にしても統計力学あるいは熱力学の基礎にこだわるなら、本質を損なわずに最も簡単なモデルを作るのがよい。それには可逆セルオートマトンを用いるのが最適である。セルオートマトンは、時間・空間のみならず、力学変数の取り得る状態さえも離散的なので、誤差のないシミュレーションを大規模かつ高速に行なうことが可能である。速いシミュレーションができるということは、エルゴード問題に対しても深い洞察を可能にする。この利点を活かして、ERCAs (Elementary Reversible Cellular Automata) と呼ぶ１次元の可逆セルオートマトンの族を考え、その熱力学的振舞について調べる研究を、ここ２、３年続けている。

今回の発表では、26R というモデルが、熱伝導に関して極めて良い性質を持っていることを明らかにし、併せて、そのこととエネルギーの散乱規則との間の関係について論じた。

ERCAs とは、各時刻 $t \in \mathbf{Z}$ において、各サイト $i \in \mathbf{Z}$ に $\sigma_i^t, \hat{\sigma}_i^t$ という、それぞれ0または1の値を取る変数が属し、それらの時間発展則が、

$$\sigma_i^{t+1} = f(\sigma_{i-1}^t, \sigma_i^t, \sigma_{i+1}^t) \text{ XOR } \hat{\sigma}_i^t \tag{1a}$$

$$\hat{\sigma}_i^{t+1} = \sigma_i^t \tag{1b}$$

で与えられるものをいう。ただしここで、α XOR $\beta = \alpha+\beta-2\alpha\beta$、関数 $f : \{0,1\}^3 \to \{0,1\}$

であり、この fを指定することによって各モデルが特定される。特に、26R と呼ぶモデルでは、$f(\lambda,\mu,\nu)=\lambda+\nu-\mu\nu-2\lambda\nu+\lambda\mu\nu$ である。実際このとき、$\sum_{\lambda,\mu,\nu}2^{4\lambda+2\mu+\nu}f(\lambda,\mu,\nu)=26$ が成立する。

26R に対して次の保存量 Φ (即ち $\Phi^{t+1}=\Phi^t$ を満たす) が定義される。

$$\Phi^t = \sum_i F(\sigma_i^t, \sigma_{i+1}^t, \hat{\sigma}_i^t, \hat{\sigma}_{i+1}^t) \tag{2a}$$

$$= \sum_i \{(\sigma_i^t - \hat{\sigma}_{i+1}^t)^2 + (\sigma_{i+1}^t - \hat{\sigma}_i^t)^2\}. \tag{2b}$$

この量は統計力学的な意味でのハミルトニアン（エネルギー）とみなすことができる。また、各ボンド $(i,i+1)$ でのエネルギー $F_{i,i+1}^t = F(\sigma_i^t, \sigma_{i+1}^t, \hat{\sigma}_i^t, \hat{\sigma}_{i+1}^t)$ は次の連続の式を満たす。

$$F_{i,i+1}^{t+1} = F_{i,i+1}^t + J_i^t - J_{i+1}^t \tag{3}$$

ここに、

$$J_i^t = (1-2\hat{\sigma}_i^t)(\sigma_{i-1}^t - \sigma_{i+1}^t) f(\sigma_{i-1}^t, \sigma_i^t, \sigma_{i+1}^t) \tag{4}$$

は、サイト i におけるエネルギーの流れを表わす。

このモデルに対して、周期 Nの周期境界条件を課すと、熱力学的に閉じた系ができる。この系については、平衡の性質及び緩和の性質に関し、良い熱力学的振舞を示すことが、これまでの研究により明らかになっている。

今回は熱伝導を論じるため、周期境界条件ではなく、次のように両端に違う温度 β_L^{-1} と β_R^{-1} の熱浴を取り付けた系を取り扱った。即ち、サイト 1 から Nまでの状態を式 (1a,b) に従って更新した後、サイト 0 と $N+1$ の状態を、条件付き確率

$$P(\sigma_0, \hat{\sigma}_0 | \sigma_1, \hat{\sigma}_1) \propto \exp[-\beta_L F(\sigma_0, \sigma_1, \hat{\sigma}_0, \hat{\sigma}_1)] \tag{5a}$$

$$P(\sigma_{N+1}, \hat{\sigma}_{N+1} | \sigma_N, \hat{\sigma}_N) \propto \exp[-\beta_R F(\sigma_N, \sigma_{N+1}, \hat{\sigma}_N, \hat{\sigma}_{N+1})] \tag{5b}$$

に応じて確率的に選ぶ。

この系に対して数値計算を行なうことにより、次のようなことが明らかになった。

1. 各サイトで温度Tが定義され、局所平衡を満たす。特に、連続的な温度勾配が形成され、しかも両端での温度のとびは非常に小さい。

2. エネルギーの流れの平均$\langle J\rangle$は、Nが大きく、温度勾配∇Tが小さいとき、Fourier の法則

$$\langle J\rangle = -\kappa\nabla T. \tag{6}$$

に従う。このとき、微視的動力学 (1) には存在しなかった左右反転対称性が回復している。この事情は、格子気体オートマトンに於ける連続的な回転対称性の回復と全く同じである。

3. 熱伝導率 κ は、Fourier の法則 (6) で与えられるものと、平衡系（大きさNの閉じた系、または両端を同じ温度の熱浴にする）でのエネルギーの流れの時間相関 $\langle J(0)J(t)\rangle$ から久保公式

$$\kappa = \frac{1}{NT^2}\sum_{t=0}^{\infty}\langle J(0)J(t)\rangle\left(1-\frac{\delta_{t0}}{2}\right) \tag{7}$$

（ここで、$J(t)=\sum_{i=1}^{N}J_i^t$であり、また $(1-\delta_{t0}/2)$ の因子は時間の離散性のために必要となる。）を用いて計算されるものとで、きわめて良い一致を示す。

以上から、26R が、熱伝導という現象に対する非常によいモデルになっていることがわかる。実は、これほどはっきりと、Fourier の法則や久保公式の成立を示すモデルは、今まで存在していなかった。このことは、セルオートマトンの計算能力の高さを歴然と示すものといえるだろう。

ではなぜ 26R はこれほどよい性質を示すのだろうか。その手がかりとして、エネルギーの塊がどのような運動をし、衝突によってその振舞がどのように変化するか、すなわち S 行列の性質について調べてみた。その結果わかったことは、26R ではエネルギーの進む方向が、衝突によって容易に変えられるということである。他のルールでは（例えば、91R と 123R について、物性研究 1988 年 6 月号の「パターン形成、運動と統計」研究会報告の中の「可逆セルオートマトンのパターンダイナミクス」をご覧いただきたい。）エネルギーの進行方向を変えるのはかなり困難である。しかしながら、これですべてがわかったわけでは決してなく、なぜ他のルールではダメなのかはわかっても、なぜ 26R はこれでよいのかは、依然として未解決のままである。その解明には、観測の時間スケールということをまともに取り扱う必要があるように思われる。

ともかくも、ERCAs の中には、非常によい熱力学的振舞を示すものからそうでないものまで、バラエティ豊かなさまざまなモデルが存在することがわかった。その違いの解明を今後進めていくつもりである。